

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR



Grado en Ingeniería Informática

TRABAJO FIN DE GRADO

Desarrollo de software de simulación en Nanotecnología

Juan Carlos Pardo Vázquez

Tutor: Sacha Gómez Moñivas

JULIO 2015

Resumen

En este trabajo fin de grado se estudia el proceso de desarrollo de una aplicación Web para facilitar la accesibilidad de la herramienta de software científico GICM a cualquier persona del campo de la nanotecnología que disponga de acceso vía Internet.

La aplicación propuesta se ha implementado en lenguaje PHP, para comunicarse con el servidor donde se encuentra alojada la herramienta científica GICM, y Javascript, para hacer un control de datos en la parte del cliente sin saturar al servidor y adaptar la visualización del sistema a cualquier dispositivo gracias a la librería Bootstrap.

Además, se estudia la implementación de un método de predicción de parámetros en el que a través de tres parámetros (constante dieléctrica de la lámina, constante dieléctrica de la muestra y grosor de la lámina) se pueda automatizar el valor que se debe asignar a otro parámetro (número de cargas) para el correcto funcionamiento de la herramienta sin tener todos los conocimientos necesarios para deducir el valor del parámetro.

Estas dos implementaciones se identifican como los objetivos principales del proyecto: el desarrollo de una aplicación Web adaptada al software GICM y un método de predicción de parámetros de configuración para la automatización del software; con la suma de ambos objetivos se obtiene el objetivo final, una aplicación web adaptada al software GICM con un sistema de predicción de parámetros de configuración automatizado.

Se describen en la memoria las etapas llevadas a cabo para la creación de la aplicación como la identificación de los requisitos, análisis, diseño y desarrollo de cada una de las partes de las que se compone la aplicación final. Además se realiza una breve introducción de todas las tecnologías utilizadas.

Al término del documento se analizan los resultados obtenidos y los avances conseguidos durante el proceso de desarrollo de la aplicación. Por último, se comentan futuros cambios y propuestas para la mejora del trabajo realizado.

Palabras clave: Simulación, nanotecnología, aplicación web, desarrollo de aplicaciones web, automatización del software, predicción.

Abstract

This final project studies the development process of a Web application to facilitate the accessibility of the scientific software tool GICM to any user in the field of nanotechnology with access to the Internet.

The suggested application has been implemented in PHP language, to communicate with the server where the GICM scientific tool is hosted, and Javascript, to control the data on the clients end without collapsing the server and to adapt the display of the system to any device thanks to the Bootstrap framework.

In addition, the implementation of a prediction method for the parameters is studied, in which, through the three parameters (dielectric constant of the thin film, dielectric constant of the sample and thin film thickness) the value that has to be assigned to another parameter (number of charges) can be automated for the proper functioning of the tool, without needing all the knowledge necessary to deduce the value of the parameter.

These two implementations are identified as the main goals of the project: the development of a Web application adapted to the GICM software and a prediction method for the configuration parameters for the automatization of the software; adding those two goals the final goal is achieved, a Web application adapted to the GICM software with an automatized prediction system for the configuration parameters.

The steps taken to create the application are described in the report as follows: the identification of the requisites, analysis, design and development of each one of the parts that compose the final application. Also a brief introduction to all the technologies used is made.

At the end of the document the results obtained and the advancements achieved during the development process of the application are analyzed. Finally, future changes and proposals for the improvement of the work conducted are discussed.

Keywords: Simulation, nanotechnology, web application, web application development, software automatization, prediction.

Agradecimientos

A mi familia y amigos por darme su apoyo durante toda la carrera en los buenos y los malos momentos.

A todos los compañeros de clase y de prácticas por ayudarme y motivarme para sacar adelante los problemas encontrados durante el camino.

A las criaturas con las que tantas horas he pasado en los laboratorios desde que salía el sol hasta la oscuridad total en días de invierno, y en verano viendo la vida pasar desde el mismo laboratorio.

Por último y no menos importante, a todos los profesores y tutores que han compartido sus conocimientos, cada uno a su manera, para formarme y darme una oportunidad como estudiante y profesional en el particular mundo de la ingeniería informática.

Glosario

AFM (Atomic Force Microscopy): es un microscopio de sonda de barrido capaz de detectar fuerzas en nanoescalas. Ha sido imprescindible para el desarrollo de la nanotecnología.

AWK: lenguaje de programación diseñado para el procesamiento de texto. Su nombre proviene de las iniciales de sus autores: Alfred Aho, Peter Weinberger y Brian Kernighan.

Biblioteca: en informática, se trata de un conjunto de funciones codificadas en un lenguaje de programación.

DOM (Document Object Model): interfaz de programación de aplicaciones con un conjunto de objetos para representar documentos HTML y XML.

ECMA (European Computer Manufacturers Association): organización actualmente internacional que se encarga de la estandarización de sistemas computarizados.

EFM (Electrostatic Force Microscopy): es un tipo de microscopio de fuerza atómica dinámico y de no-contacto.

Framework: en aplicaciones web se trata de un entorno de trabajo que proporciona bibliotecas, estructuras y otras herramientas que ayudan al desarrollo web.

GICM (Generalized Image Charged Method): se trata de una técnica para calcular el potencial electrostático y fuerza vertical para las configuraciones de un EFM.

GNU: se trata de un sistema operativo de tipo Unix perteneciente al proyecto GNU formado en su totalidad por software libre. Su nombre es un acrónimo de “GNU’s Not Unix”.

HTML (HyperText Markup Language): lenguaje de etiquetas con el que se crean páginas web.

LaTeX: se trata de un sistema de composición de textos con alta calidad tipográfica a partir de comandos TeX ampliamente extendido en el sector científico.

Licencia GNU: es la licencia más usada en paquetes de software libre. Permite la utilización del código libremente por cualquier usuario.

Licencia MIT: se trata de un tipo de licencia de software libre empleada por el Instituto Tecnológico de Massachusetts que le da nombre. Esta licencia permite la reutilización y modificación del código bajo el que se encuentra.

PHP (Hypertext Preprocessor): lenguaje de código abierto adecuado para el desarrollo web ya que es ejecutado en el servidor y permite la comunicación con el lado del cliente.

POSIX (Portable Operating System Interface uniX): estándar de interfaz de sistemas operativos portables en unix, intenta asegurar la portabilidad entre diferentes sistemas operativos.

Software Libre: software que respeta la libertad de los usuarios y la comunidad para que cada usuario pueda ejecutar, copiar, distribuir, estudiar, modificar y mejorar el software.

STM (Scanning Tunneling Microscope): microscopio basado en el efecto túnel que se utiliza para tomar imágenes de superficies a nivel atómico.

Tipografía: características de un texto como su diseño, forma, tamaño y relaciones visuales con otros elementos del texto.

Word: procesador de textos de la suite ofimática *Microsoft Office*.

Índice

Resumen	Página 2
Palabras clave	Página 3
Agradecimientos	Página 6
Glosario	Página 7
1. Introducción	Página 13
1.1 Motivación	Página 13
1.2 Objetivos	Página 15
1.3 Estructura de la memoria	Página 16
2. Estado del arte	Página 17
3. Desarrollo del proyecto	Página 27
3.1 Análisis	Página 27
3.2 Diseño	Página 38
3.3 Desarrollo	Página 43
4. Evaluación de los resultados	Página 50
5. Conclusiones y trabajo futuro	Página 52
Referencias	Página 53
Anexos	Página 55

Índice de figuras

Figura 1. Componentes del Microscopio de Fuerza Atómica	Página 18
Figura 2. Componentes del Microscopio de Efecto Túnel	Página 19
Figura 3. Elementos del interior de la punta del AFM con GICM	Página 20
Figura 4.	Página 21
a) Esquema de la punta para GICM con todos sus componentes	
b) Distribución equipotencial de una configuración EFM estándar calculada con GICM	
Figura 5. Caso de uso Cálculo predicción de parámetros	Página 32
Figura 6. Diagrama secuencia caso de uso Predicción	Página 33
Figura 7. Caso de uso Resultados para fuerza	Página 34
Figura 8. Diagrama de secuencia caso de uso Resultados de fuerza	Página 35
Figura 9. Caso de uso Cálculo Resultado potencial electrostático	Página 36
Figura 10. Diagrama de secuencia de caso de uso Resultado Potencial electrostático ..	37
Figura 11. Maqueta 1 de la aplicación web	Página 40
Figura 12. Maqueta 2 de aplicación web	Página 40
Figura 13. Fragmento de tabla comparativa de voltajes por número de cargas .	Página 47
Figura 14. Gráfico de Grosor-#cargas con constantes dieléctricas 100 y 4	Página 48
Figura 15. Gráfico C-Cte dieléctrica muestra con constante dieléctrica 130	Página 49
Figura 16. Captura de pantalla de aplicación web	Página 51

Índice de tablas

Tabla 1. Clasificación de requisitos funcionales	Página 28
Tabla 2. Clasificación de requisitos no funcionales	Página 30
Tabla 3. Caso de uso Predicción de parámetro	Página 33
Tabla 4. Caso de uso Resultados de fuerza	Página 35
Tabla 5. Caso de uso Resultados potencial electrostático	Página 37

1. Introducción

1.1. Motivación

A día de hoy en todas áreas científicas, ya sean ciencias sociales como la economía, naturales como la biología o formales como las matemáticas y lógicas, se utilizan sistemas software que sirven de herramienta y de apoyo para los científicos en su búsqueda de contrastación de hipótesis o resolución de problemas.

En el contexto científico, a diferencia de otros tipos de software como el que nos podemos encontrar en cualquier ordenador personal, el software necesita de unos conocimientos muy especializados en el campo tratado previos a su ejecución para su correcta utilización.

Un ejemplo para entender esta diferencia es el de *LaTeX* y *Microsoft Office Word*. No hace falta entrar en detalle de la funcionalidad de cada uno para entender nuestra motivación, sino en su uso cotidiano como software de escritura de documentos. Si se le pregunta a cualquier persona (que al menos tenga un ordenador personal) qué es *LaTeX*, probablemente casi nadie piense en el sistema de procesado de textos del que hablamos, mientras que si la pregunta la hacemos sobre *Word* todo el mundo lo conozca y seguramente lo use en su día a día. Los dos sistemas ofrecen funcionalidades similares pero sólo se conoce uno.

Esto se debe a que *LaTeX* requiere una serie de comandos para construir la tipografía deseada mientras que en *Word* esa tipografía se selecciona de una manera fácil e intuitiva.

Para poner otro ejemplo sobre la dificultad que tiene el software científico podemos fijarnos nuevamente en la herramienta de *Microsoft Word* para la automatización de la corrección ortográfica. Un usuario medio puede crear su diccionario personalizado y automatizar de esta manera que el propio *Word* encuentre errores ortográficos en un documento, por tanto un usuario con conocimientos gramaticales y ortográficos buenos puede diseñar un sistema automatizado de corrección ortográfica en este sistema.

Lo mismo ocurre en los sistemas software científicos, salvo que el tipo de conocimientos que requiere el usuario está mucho más especializado en su rama científica: para diseñar un sistema de predicción en los valores de bolsa el diseñador deberá tener unos conocimientos previos en economía, y lo mismo ocurre en nuestro caso, para el diseño de predicción de parámetros de configuración del sistema GICM ^[Ref 1] se requieren los conocimientos en física y nanotecnología necesarios para entender el funcionamiento de la aplicación.

Podemos decir que el software de simulación científica se enfrenta a dos grandes problemas:

- ❖ Hace falta configurarlo adecuadamente con un conocimiento muy especializado de la materia que se va a tratar, tanto que algunos sistemas se han creado tras largos periodos de investigación y trabajo en el área.
- ❖ Habitualmente no se encuentra disponible en plataformas de fácil acceso y no existe suficiente compatibilidad debido a que la comunidad científica programa en su mayoría para entornos Linux y se suele trabajar con el sistema operativo Windows para las tareas que no requieren programación.

1.2. Objetivo

El objetivo esencial de este trabajo es facilitar el uso de software de simulación científica haciéndolo más accesible y por tanto más útil, y ayudar a configurarlo a la comunidad científica que no llegue a tener suficientes conocimientos teóricos como se requieren ahora para su uso.

En particular se va a facilitar el uso de GICM, sistema software de simulación científica, que tiene un esfuerzo de optimización de algoritmos que hace que sea especialmente rápido pero carece de suficiente accesibilidad. Para solucionar este problema, se creará una aplicación web facilitando así su acceso y además se diseñará un sistema de predicción de uno de los parámetros más importantes que ayude a configurar mejor el sistema sin la necesidad de tener todos los conocimientos previos que se necesitan para su correcta ejecución.

Para conseguir este objetivo podemos diferenciar tres objetivos parciales que al unificarlos consigan completar el objetivo esencial del trabajo:

- ❖ Desarrollo de una aplicación Web adaptada al software GICM
- ❖ Método de predicción de parámetros de configuración para la automatización del software
- ❖ Integración de la aplicación web con el sistema de predicción de parámetros.

1.3. Estructura de la memoria

La memoria del proyecto sigue el siguiente esquema:

- ❖ Resumen: este apartado incluye un breve resumen del trabajo realizado junto a un listado de palabras clave identificativas de la propuesta. Este apartado se incluye tanto en español como en inglés.
- ❖ Agradecimientos
- ❖ Índice: se incluyen los índices del contenido y de los diferentes recursos usados en la memoria (figuras, tablas).
- ❖ Glosario
- ❖ Introducción: contiene las motivaciones, el objetivo y la estructura de la memoria.
- ❖ Estado del Arte
- ❖ Desarrollo de la propuesta: contiene los siguientes apartados
 - Análisis
 - Diseño
 - Desarrollo
- ❖ Evaluación de los resultados: desarrollo de pruebas y estudio de los resultados obtenidos.
- ❖ Conclusión y trabajo futuro
- ❖ Referencias
- ❖ Anexos

2. Estado del arte

Para cumplir con los objetivos presentados en el capítulo anterior tendremos que utilizar una serie de herramientas en nuestro proyecto, pero antes debemos entender los aspectos fundamentales de la ciencia en la que nos encontramos.

Nanotecnología

Una de las definiciones de nanotecnología es “el estudio y desarrollo de sistemas a escala nanométrica” [Ref 2]

La escala nano indica que la unidad en la que se trabaja es 10^{-9} o lo que es lo mismo 0,000 000 001. A este nivel las aplicaciones que se desarrollan se basan principalmente en la manipulación de átomos y moléculas demostrando fenómenos y propiedades en ocasiones desconocidas para los científicos, por ello se emplea habitualmente para crear materiales y sistemas con propiedades únicas, cumpliendo así con la proposición del considerado “padre de la nanociencia” Richard Feynman [Ref 3], premio Nóbel de Física, cuando sugirió en el año 1959 fabricar productos en base a un reordenamiento atómico y molecular.

Para poder trabajar en esta escala se deben utilizar herramientas especializadas ya que los equipos más convencionales como los microscopios ópticos de poco o nada sirven.

Las herramientas a día de hoy pertenecen a la microscopía de sonda de barrido, en la que una sonda puntiaguda barre la superficie de una muestra monitorizando las interacciones que ocurren entre la punta y la muestra. De esta forma se pueden medir las propiedades de conductividad superficial, la distribución de carga estática o las características de los campos magnéticos. Los dos microscopios de barrido más importantes son los siguientes:

- Microscopio de fuerza atómica: Inventado por Gerd Binnig junto con otros dos científicos de IBM (Quate y Gerber) en 1986, fue comercializado por primera vez en 1989. El AFM (Atomic Force Microscope) usa una técnica de medida superficial en la que una punta situada en el extremo de una palanca flexible recorre la superficie de la muestra monitorizando la interacción de la punta con la muestra a través

del reflejo de una láser en la parte trasera de la palanca recogido por un detector fotodiodo. Este fotodiodo determina con precisión los cambios en la inclinación o amplitud de oscilación de la punta por la diferencias de voltaje de los segmentos que lo componen.

Existen varias modalidades del AFM:

- Modo de contacto: se mantiene constante la fuerza entre punta y muestra. Este modo puede presentar problemas para muestras biológicas debido a su delicadeza.
- Modo de no contacto: se mantiene constante la frecuencia de resonancia y la punta no toca la superficie de la muestra. nuestro sistema de simulación se basa en este modo.
- Modo intermitente o de repiqueteo: se mantiene constante la amplitud y se usa principalmente para muestras en medios líquidos.

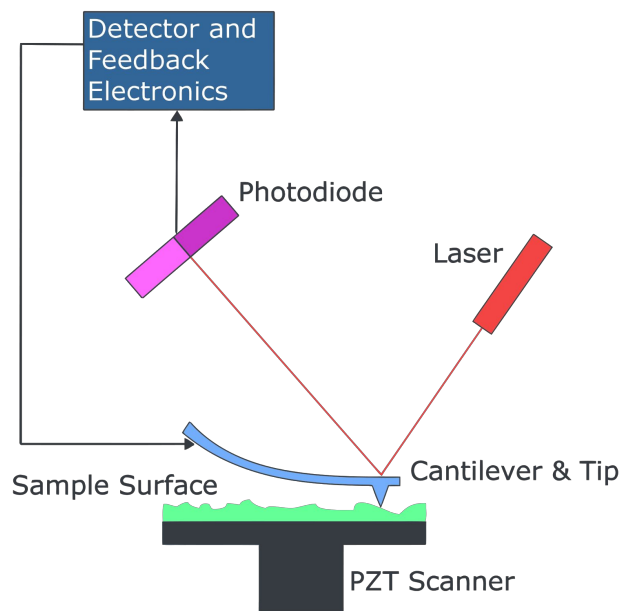


Figura 1. Componentes del Microscopio de Fuerza Atómica

- Microscopio de efecto túnel: Desarrollada por Binning y Rohrer en los laboratorios IBM en Suiza, su descubrimiento fue galardonado con el Premio Nobel de Física en 1986 [Ref 4]. El STM como su propio nombre indica usa la técnica del efecto túnel, utilizando una punta conductora

colocada muy próxima a la superficie y aplicando una diferencia de voltaje entre la punta y la superficie, permite el paso de electrones de una a otra. Esta técnica requiere superficies limpias y estables, puntas afiladas y un alto control de vibraciones junto a una electrónica muy sofisticada.

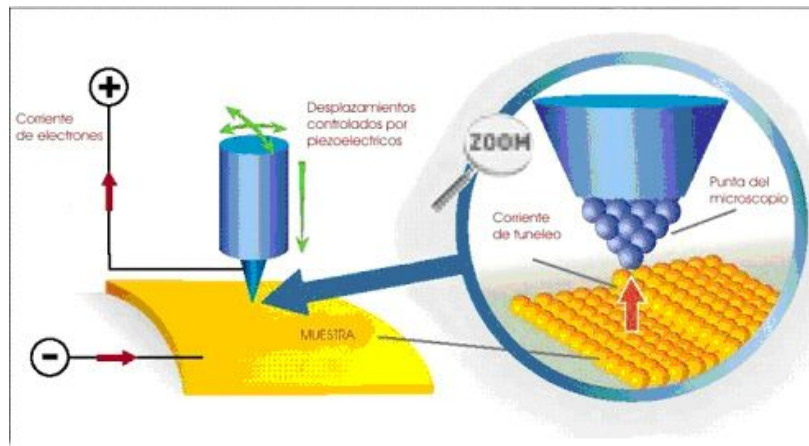


Figura 2. Componentes del Microscopio de Efecto Túnel

La simulación que realizamos en este trabajo se basa en el microscopio de fuerza electrostática (EFM) que se trata de un caso particular de microscopio dinámico de no-contacto del anteriormente mencionado AFM. Que sea dinámico significa que la punta oscila y al ser de no-contacto la punta y la muestra no se tocan. Además puede detectar las fuerzas de atracción o repulsión con la muestra a una distancia de aproximadamente 100 nm.

El principal problema de estas simulaciones con el EFM está relacionado con las diferentes escalas, ya que la punta tiene una escala del orden de micrómetros mientras que la distancia punta-muestra está en el orden de nanómetros. Para intentar solucionar estos problemas se usa el método GICM que en nuestro caso nos será de gran utilidad para analizar el comportamiento electrostático.

GICM

Del inglés (Generalized Image-Charge Method) es una técnica para intentar solucionar los problemas que pueden generar la diferencia de magnitudes entre los elementos que componen la configuración del EFM debido a que la naturaleza de las

fuerzas electrostáticas de largo alcance debe tener en cuenta cada uno de los elementos macroscópicos para una simulación lo más realista posible.

El funcionamiento del GICM es el siguiente: la punta del AFM contiene una densidad de carga superficial, este método sustituye esa densidad por un conjunto de cargas puntuales y segmentos de cargas lineales a lo largo del eje. Estas cargas desempeñan el papel de unidades en la red por el valor absoluto de la carga Q_i que se obtiene tras operar con mínimos cuadrados el potencial electrostático en la superficie de la punta.

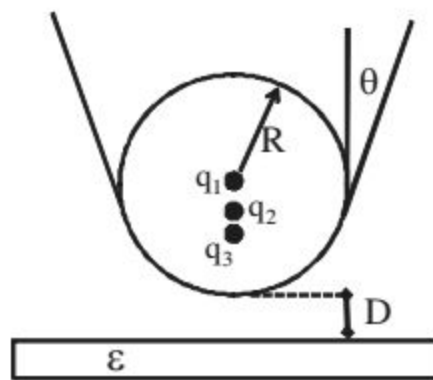


Figura 3. Elementos del interior de la punta del AFM con GICM

Este método genera unos resultados suficientemente precisos para ser utilizados como patrones de entrada a una red neuronal artificial que estime magnitudes físicas en EFM, aunque se encuentra con dos problemas principalmente: saber el número de cargas que hay que colocar y las posiciones de cargas R_i .

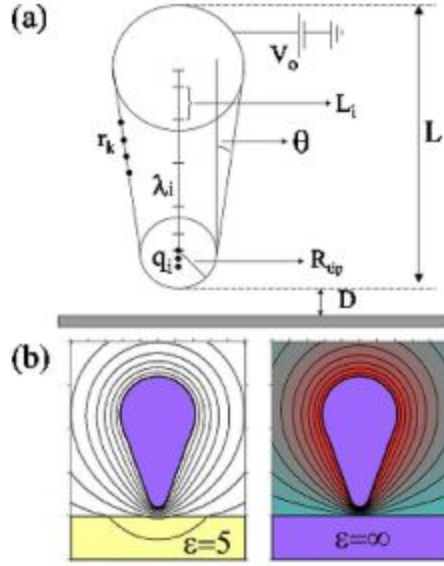


Figura 4. a) Esquema de la punta para GICM con todos sus componentes

Figura 4.b) Distribución equipotencial de una configuración EFM estándar calculada con GICM

La distribución de cargas dentro de un elemento conductor no juega ningún papel siempre y cuando se mantenga el valor equipotencial de la superficie, de esta forma y usando el formalismo de la función de Green [ref 5] se puede escribir el potencial electrostático como:

$$V(r) = \sum_i^{N_p} \frac{Q_i}{\epsilon_0} G(r, r_i, L_i)$$

donde $N_p = N_c + N_s$, L_i es la mitad de la longitud de los segmentos, r_i es la posición del elemento de carga, r es la posición donde V es calculado, Q es la carga del elemento i (q_i para cargas puntuales, λ para segmentos) y $G = G_i + G_p$ es una función que sólo depende de la geometría.

Para superficies compuestas de un material semi-infinito metálico o dieléctrico, una simple carga imagen es suficiente. Para muestras compuestas por un conjunto de láminas dieléctricas esto se complica.

El potencial electrostático de cualquier punto de la superficie r va a ser la suma de las contribuciones de las N_c cargas y los N_s segmentos lineales.

$$V(r_k) = \sum_i^{N_c} \frac{q_i}{\epsilon_0} G(r_k, r_i) + \sum_i^{N_s} \frac{\lambda_i 2L_i}{\epsilon_0} G(r_k, r_i, L_i)$$

Donde la función de Green para el segmento lineal viene dada por

$$G(r_k, r_i, L_i) = \int_{z_i - L_i}^{z_i + L_i} G(r_k, z) dz$$

Las condiciones límite en la superficie de la muestra están fijadas por G_p . Aún no se puede resolver el problema electrostático debido a que falta por hallar q_i, λ_i, r_i y L para ajustar el potencial en la superficie de la punta. El cálculo conjunto de estas magnitudes se transforma en un problema no lineal que incrementa sustancialmente el tiempo de computación, sin embargo, si se fijan las posiciones y las longitudes, se puede utilizar el método de los mínimos cuadrados para q_i y λ_i . Al tener una relación proporcional de estas variables con el voltaje, y el problema se vuelve lineal.

Si se fijan r_i, L_i y el potencial electrostático en la superficie de la punta, se obtienen los mejores valores de q_i, λ_i a través de la minimización de

$$X^2 = \sum_{k=1}^{N_T} [V(r_k) - V_0]^2$$

donde N_T es el número de puntos distribuidos en la punta en las posiciones r_k . La elección apropiada para las posiciones r_i y longitudes L_i es crítica para un funcionamiento óptimo del método GICM.

WSxM

WSxM es un software de simulación científica desarrollado por Nanotec Electrónica. En su última versión estable se pueden introducir valores de coordenadas obtenidos con GICM para visualizar los componentes y formas de la muestra y estudiar su comportamiento de manera visual.

Además tiene soporte para escaneado nanoscópico y herramientas de obtención de datos con microscopios conectados.

A continuación se describen el resto de herramientas empleadas para la realización del proyecto:

PHP

El lenguaje PHP (acrónimo de Hypertext Preprocessor) es un lenguaje de código libre utilizado principalmente en desarrollo web por su capacidad de intercalación con el código HTML, de manera que pueda ejecutarse entre líneas de dicho código.

A diferencia de HTML y Javascript, el código PHP se ejecuta en el lado del servidor generando un HTML con la respuesta y devolviéndole al lado del cliente (navegador web). De esta forma el usuario no tiene por qué ver el código que se está ejecutando y sólo ve el resultado final que se devuelve de la página.

Su principal utilización es para el desarrollo de scripts que necesiten ejecutarse en el lado del servidor, como en nuestro caso, para la ejecución del script que ejecutará la herramienta GICM con los datos obtenidos del formulario, pero se puede utilizar de diversas formas gracias a su potencia y numerosas capacidades de creación, soporte a bases de datos, compatibilidad con sistemas operativos, etc.

Javascript

Javascript es un lenguaje de programación interpretado, estandarizado en su primera versión como ECMAScript por el propio ECMA (European Computer Manufacturers Association) en 1997. No se debe confundir con el lenguaje Java ya que sus propósitos y semántica son diferentes.

Su uso principal es en el lado del cliente para aplicaciones web, siendo interpretado por la totalidad de los navegadores modernos cuando se encuentra integrado en las páginas web. Su objetivo principal es la manipulación e interpretación de los elementos que componen la página HTML, o también llamados DOM (Document Object Model). Gracias al lenguaje Javascript se ha avanzado mucho en las mejoras de interfaz de usuario y la creación de páginas webs dinámicas.

JQuery

En el lenguaje Javascript se han desarrollado bibliotecas para facilitar la codificación y ampliar las opciones de manipulación de elementos DOM. Una de las bibliotecas más importantes es JQuery, con la que se simplifica la forma de interactuar con elementos HTML, el desarrollo de interacciones, animaciones o el desarrollo de técnicas como AJAX que permiten la comunicación entre el lado del cliente y del servidor en una página web de manera asíncrona.

JQuery está creada como software libre, de código abierto y posee licencia MIT y GNU, lo que permite que se pueda utilizar para proyectos de código libre o privado.

Bootstrap

Además de bibliotecas también existen frameworks que facilitan y mejoran la experiencia y el desarrollo web. Bootstrap es uno de ellos. Gracias a Bootstrap y su soporte para HTML5 y CSS es posible el diseño de sitios web adaptables, esto significa que se adapta la visualización de las aplicaciones dependiendo del tamaño del dispositivo donde se están ejecutando.

También posee licencia MIT, es de código abierto y compatible con la mayoría de los navegadores web modernos.

AWK

Se trata de un lenguaje de programación orientado principalmente para el procesamiento de datos provenientes de textos, tanto de ficheros como de flujo de datos. La implementación para GNU se llama gawk.

La principal función de awk en su procesamiento de textos es la búsqueda por líneas que cumplan una condición. Además de por líneas se puede buscar por unidades del texto (acceder a los datos de ciertas filas o columnas y manipularlos).

El uso de awk es rápido y sencillo: se indica el dato a buscar y la acción que va a hacer una vez se encuentre. Esto hace que su uso para este tipo de tareas sea ventajoso frente a otros lenguajes de programación como C, C++ o java en los que para hacer este tipo de acciones es más dificultoso describir los datos con el uso de funciones o bibliotecas

adicionales para procesar textos. Por este motivo se ha elegido awk para una de las tareas de la herramienta.

Para un uso más complejo awk permite la búsqueda por expresiones regulares y un tipo de dato como son las listas asociativas para manipular datos con arrays indexados por cadenas como claves.

BASH

Intérprete de órdenes basado en la shell de Unix utilizado como intérprete predeterminado en la mayor parte de sistemas GNU/Linux, su nombre proviene del juego de palabras “*Bourne-Again Shell*”.

Este intérprete permite entre otras cosas la creación y ejecución de scripts que utilizan el lenguaje explicado anteriormente, AWK, además del lanzamiento de órdenes de ejecución para programas ejecutables como el GICM.

Cygwin

Desarrollada por la empresa Cygnus Solutions y mantenida por trabajadores de Red Hat, Cygwin es una colección de herramientas que permite simular un entorno similar a los sistemas Unix dentro de Microsoft Windows, sin necesidad de hacer una máquina virtual y ejecutándose en el propio sistema operativo.

La colección de herramientas está compuesta principalmente por herramientas de código abierto o con licencia GNU que se ejecutan igual que en las distribuciones de Linux, y un fichero que provee funcionamiento y recompilación de ficheros fuentes para ejecutarse se como si de un sistema POSIX se tratara.

Jama

Paquete de álgebra lineal básico para el lenguaje de programación Java. Proporciona funcionalidad suficiente para resolver problemas básicos con matrices de una forma rápida y eficaz gracias a sus clases definidas de componentes algebraicos para construir y manipular dichas estructuras.

La biblioteca es de dominio público, su autor y creador es el NIST (Instituto Nacional de Estándares y Tecnología) y su última versión estable data de 2012.

Entre otras funciones, permite el productos de matrices y la resolución de sistemas de ecuaciones, lo que podremos utilizar para resolver ecuaciones de múltiples incógnitas en la parte de predicción de parámetros automatizados.

3. Desarrollo de la propuesta

Como se ha explicado en el apartado del objetivo, el proyecto consta de tres objetivos parciales para su realización. Dos de ellos son independientes entre sí y el tercer objetivo se trata de unificar los anteriores. Por tanto se van a diferenciar los apartados de análisis, diseño y desarrollo para cada uno (desarrollo de la aplicación web y método de predicción de parámetros) ya que se han utilizado herramientas diferentes y buscan una funcionalidad independiente entre sí.

La estructura para las siguientes secciones va a ser la siguiente:

En primer lugar, el análisis, se hace sobre el objetivo final del trabajo, es decir los requisitos necesarios para la aplicación web con el sistema de predicción integrada.

En segundo lugar, se explica el diseño independiente de la aplicación web, el del sistema de predicción de parámetros de configuración y por último la integración de ambas partes.

En tercer y último lugar, se aborda cómo se ha realizado el desarrollo de la aplicación web, explicando qué herramientas web se han utilizado para conseguir la aplicación deseada, y por otro lado cómo se ha desarrollado el sistema de predicción de parámetros y con qué herramientas ha sido posible cumplir este objetivo más teórico e interno de la aplicación.

3.1 Análisis

Para la aplicación web es indispensable identificar los requisitos que debe cumplir el sistema para satisfacer las necesidades del usuario final. Para ello es necesario haberse reunido con un futuro usuario para obtener la información de cómo va a ser el funcionamiento de la aplicación esperado.

Tras unas reuniones con el usuario final del sistema se han definido y validado los requisitos funcionales de la aplicación. A continuación se identifica en una tabla la clasificación de los requisitos de nuestro sistema:

Requisitos funcionales	Objetivo
Requisitos de datos	Almacenamiento y tratamiento de la información
Requisitos de interfaz	Interacción del usuario
Requisitos navegacionales	Navegación del usuario por el sistema
Requisitos personalización	Comportamiento del sistema por tipo de usuario
Requisitos transaccionales	Funcionamiento interno del sistema

Tabla 1. Clasificación de requisitos funcionales

Requisitos funcionales

1. Requisitos de datos:

- a. Lectura de datos: El sistema maneja la información de al menos 17 parámetros introducidos por el usuario para el cálculo de resultados.

Estos parámetros imprescindibles son: voltaje aplicado, radio de la punta, longitud de la punta, ángulo de la punta, constante dieléctrica de la lámina, constante dieléctrica de la muestra, grosor de la lámina, distancias entre la punta y la muestra (inicial, final y número de puntos), cargas puntuales en la punta, segmentos en la punta, número de puntos en la superficie de la punta (3 valores) y especificar si se quiere calcular el potencial electrostático o la fuerza (para el segundo caso el sistema maneja datos de 6 parámetros más).

Estos datos se almacenarán en un fichero dentro del servidor.

- b. Escritura de datos: Una vez termine los cálculos el sistema generará los datos de salida en ficheros de texto en el servidor, que se enviarán al usuario para su descarga.
- c. Eliminación de datos: Tras el envío de estos ficheros para su descarga el sistema eliminará los datos junto a los ficheros creados.

2. Requisitos de interfaz:

- a. Inserción de parámetros: El usuario tiene que introducir los valores de la mayor parte de los parámetros manualmente a través de un formulario para que la aplicación funcione correctamente.
- b. Ejecución del sistema: El usuario deberá clicar el botón de “calcular” para ejecutar la operación de predicción o de “resultados” para obtener los resultados de las operaciones de GICM con los parámetros aplicados.
- c. Control de errores: El sistema avisará al usuario cuando un parámetro toma valores incorrectos a través de un mensaje de error en la pantalla en el lugar del parámetro señalado.
- d. Visualización de ayuda: El sistema muestra ayuda por pantalla con la información de los parámetros al pasar por ciertas zonas de la pantalla.
- e. Visualización de información: El sistema muestra imágenes explicativas de la técnica de GICM y de los parámetros identificados en las figuras.

3. Requisitos navegacionales: Para facilitar su adaptación a cualquier página científica, la aplicación se basa en una única página donde el usuario puede realizar cualquier tipo de acción admitida, por tanto es innecesaria la navegación y no se dispone de ningún requisito de este tipo.

4. Requisitos de personalización: Al no disponer de una sesión o una forma de hacer login el sistema se comportará igual para cualquier tipo de usuario, por tanto no hacen falta requisitos de personalización.

5. Requisitos transaccionales:

- a. Ejecución “resultados”: Si todos los parámetros se han introducido correctamente el sistema generará un fichero interno llamado *geninp.gic* que contendrá los valores que el usuario haya introducido en los parámetros. Tras la creación de este fichero el sistema

ejecutará *GICM v1.0* y esto generará varios ficheros con los resultados. Una vez generados estos ficheros de salida el sistema los enviará al usuario para descargar desde el navegador.

- b. Predicción de parámetros: El usuario si lo desea puede pulsar un botón que realice un cálculo predictivo sobre el parámetro *número de cargas*.
- c. Descarga de la información: El sistema generará las soluciones que serán descargadas por el usuario en formato de texto plano.

Tras la identificación de los requisitos funcionales del sistema, vamos a clasificar los requisitos no funcionales que debe cumplir con la siguiente tabla:

Requisitos no funcionales	Objetivo
Usabilidad	Facilidad de uso
Rendimiento	Capacidad de procesamiento rápido
Requisitos software	Sistemas internos necesarios
Requisitos hardware	Dispositivos o accesorios necesarios

Tabla 2. Clasificación de requisitos no funcionales

Requisitos no funcionales

1. Usabilidad: El sistema debe presentar una interfaz fácil de usar, con una pantalla de introducción de datos sencilla e intuitiva para que cualquier usuario con un mínimo de experiencia en informática sea capaz de usar la herramienta.
2. Rendimiento: El servidor debe procesar los datos introducidos rápida y eficazmente a través de la ejecución del programa *GICM* para que el usuario tenga una respuesta rápida y no sufra interrupciones ni bloqueos en su navegador web.

3. Requisitos software:

- a. El usuario deberá disponer de un navegador web convencional (chrome, firefox, IE) con soporte para las librerías javascript utilizadas (jquery, bootstrap). Si el navegador carece de soporte para estas librerías la experiencia del usuario puede ser defectuosa o incompleta.
- b. El servidor web debe estar instalado en el sistema operativo Windows con la aplicación GICM instalada en el mismo directorio. Debido a que GICM sólo está disponible para windows es necesario que el servidor se instale con el mismo sistema operativo.
- c. El usuario tiene que tener acceso al servidor.

4. Requisitos hardware:

- a. El usuario debe tener un dispositivo (ordenador, móvil, tablet) con capacidad suficiente para la ejecución de una aplicación de navegación web compatible con javascript.
- b. El usuario debe disponer de alguna herramienta para la introducción de texto.
- c. El servidor no requiere de demasiada capacidad de disco duro pero si es recomendable un procesador adecuado para la ejecución del GICM.

Casos de uso

Se diferencian tres posibles casos de uso de la aplicación web final, dependiendo de lo que las acciones que realice el usuario:

Predicción de parámetro de configuración automatizado

En la siguiente figura se muestra el caso de uso, donde el usuario pide al sistema la predicción de un parámetro de configuración.

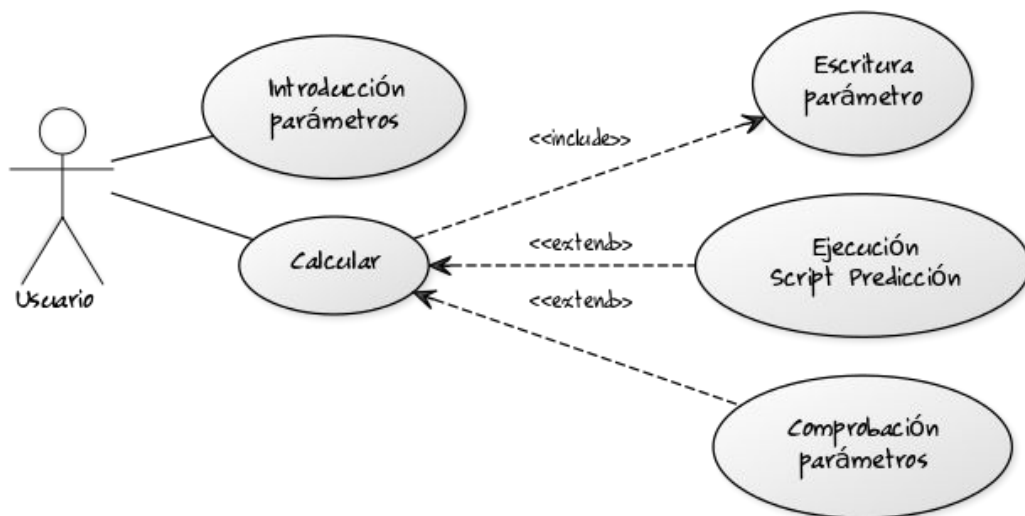


Figura 5. Caso de uso Cálculo predicción de parámetros

Descripción del caso de uso

Nombre: Predicción de parámetro de configuración automatizado.

Descripción: El usuario deberá introducir el valor de los tres parámetros necesarios para el cálculo del parámetro automatizado y pulsar un botón para que el sistema realice la predicción y muestre en la casilla correspondiente el valor calculado.

Propósito: Automatizar un parámetro de configuración correcto.

Precondiciones: Deben tener un valor numérico los siguientes parámetros: constante dieléctrica de la lámina, constante dieléctrica de la muestra y grosor de la lámina.

Postcondiciones: Los datos introducidos deben ser numéricos y correctos.

Usuario	Sistema
Introducción de parámetros	
Pulsa botón Calcular	Comprobación de parámetros
	Ejecución de Script de predicción
	Escritura de parámetro #cargas en su campo correspondiente

Tabla 3. Caso de uso Predicción de parámetro

El diagrama de secuencia de esta acción va a ser el siguiente:

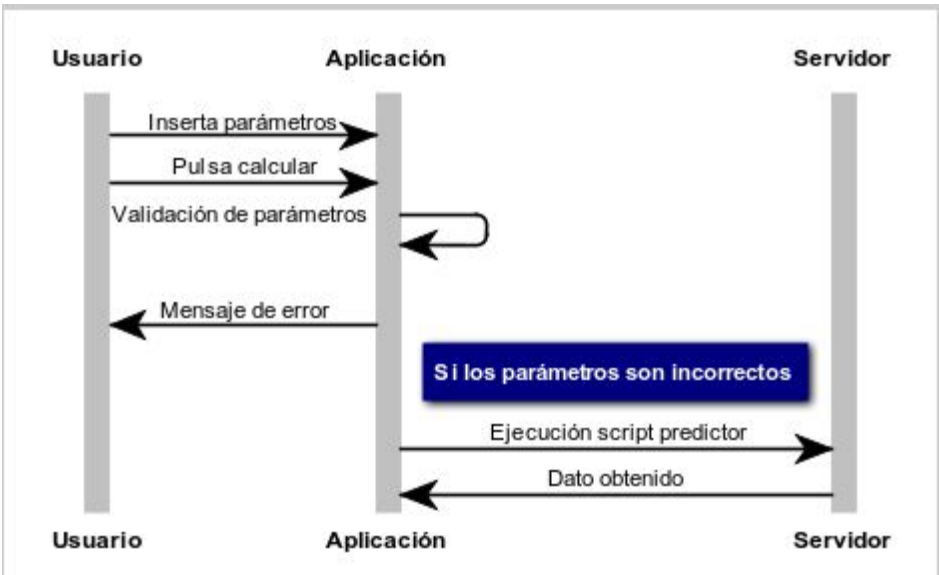


Figura 6. Diagrama secuencia caso de uso Predicción

Ejecución del programa GICM para fuerza

En la siguiente figura se muestra el caso de uso, donde el usuario ejecuta la herramienta GICM para el caso de fuerza:

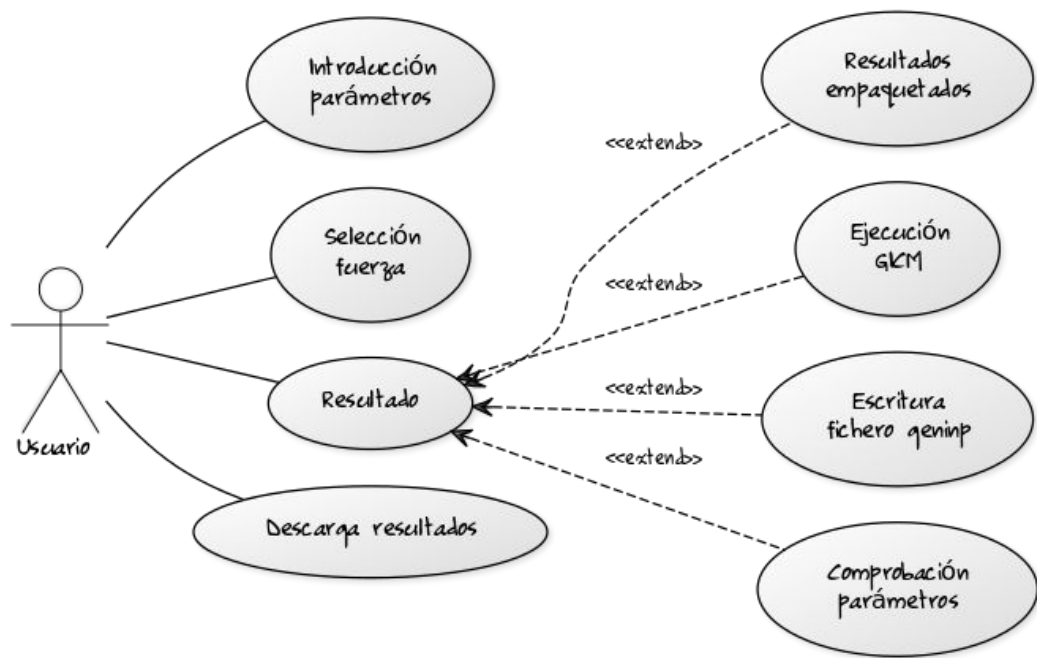


Figura 7. Caso de uso Resultados para fuerza

Descripción del caso de uso

Nombre: Ejecución del programa GICM para fuerza.

Descripción: El usuario pide al sistema el resultado de la ejecución del GICM para el cálculo de fuerzas.

Propósito: Ejecutar GICM para fuerza y obtener los resultados.

Precondiciones: El usuario debe completar todos los parámetros necesarios para el cálculo de la operación.

Postcondiciones: Los datos introducidos deben ser numéricos y correctos, el usuario debe aceptar la descarga de los resultados.

Usuario	Sistema
Introducción de parámetros	
Seleccionar “fuerza”	

Pulsa botón Resultado	Comprobación de parámetros
	Escritura de fichero geninp
	Ejecución de GICM
	Obtención de resultados empaquetados
Descarga de resultados	

Tabla 4. Caso de uso Resultados de fuerza

El diagrama de secuencia de esta acción va a ser el siguiente:

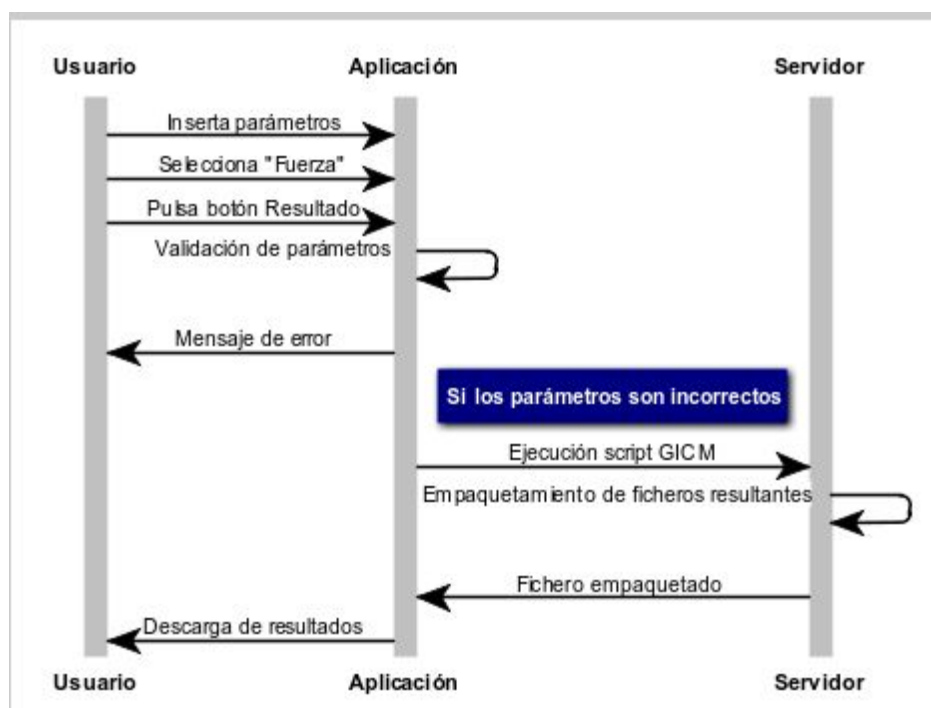


Figura 8. Diagrama de secuencia caso de uso Resultados de fuerza

Ejecución del programa GICM para potencial electrostático

En la siguiente figura se muestra el caso de uso, donde el usuario ejecuta la herramienta GICM para el caso de potencial electrostático:

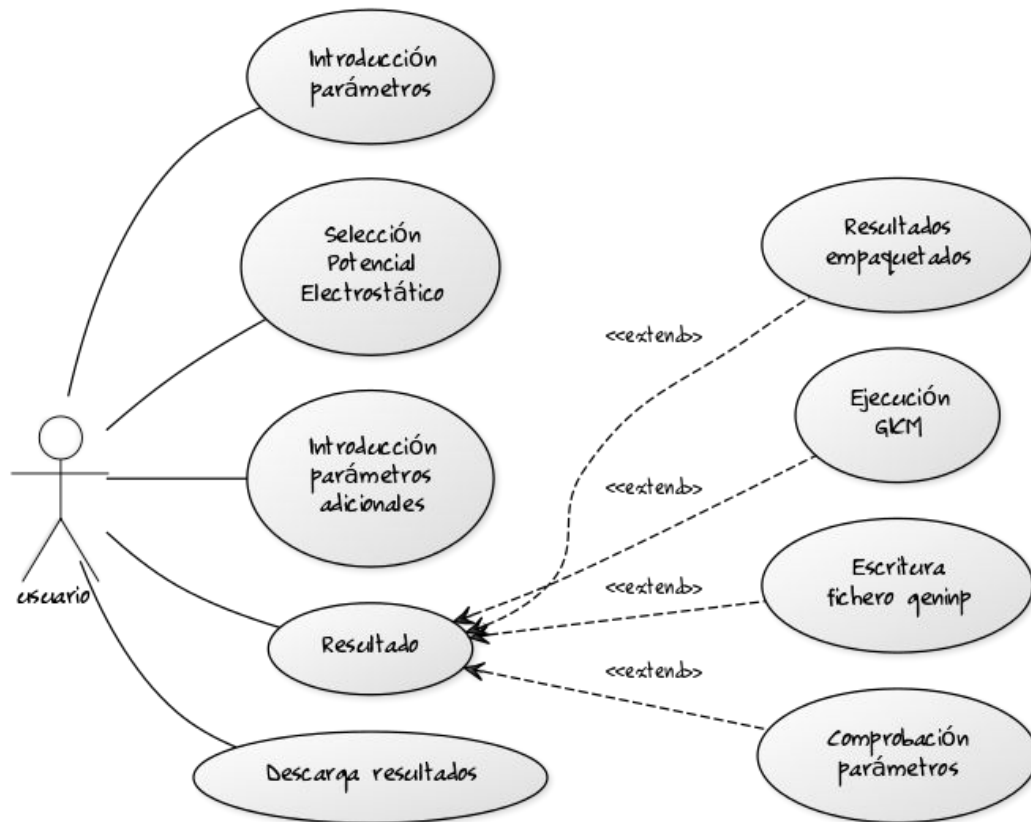


Figura 9. Caso de uso Cálculo Resultado potencial electrostático

Descripción del caso de uso

Nombre: Ejecución del programa GICM para potencial electrostático.

Descripción: El usuario pide al sistema el resultado de la ejecución del GICM para el cálculo del potencial electrostático.

Propósito: Ejecutar GICM para potencial electrostático y obtener los resultados.

Precondiciones: El usuario debe completar todos los parámetros necesarios para el cálculo de la operación.

Postcondiciones: Los datos introducidos deben ser numéricos y correctos, el usuario debe aceptar la descarga de los resultados.

Usuario	Sistema
Introducción de parámetros	
Seleccionar “ potencial electrostático”	
Introducción de parámetros específicos	
Pulsa botón Resultado	Comprobación de parámetros
	Escritura de fichero geninp
	Ejecución de GICM
	Obtención de resultados empaquetados
Descarga de resultados	

Tabla 5. Caso de uso Resultados potencial electrostático



Figura 10. Diagrama de secuencia de caso de uso Resultado Potencial electrostático

3.2 Diseño

En este apartado, debido a sus diferencias, se explica detalladamente el diseño de la aplicación web completa, es decir, con el sistema de predicción integrado, y posteriormente se detalla cómo se ha diseñado dicho sistema de automatización de parámetros independientemente de la aplicación web.

Aplicación web

La aplicación web está formada por una pantalla en la cual el usuario podrá acceder a todas las funcionalidades que ofrece el sistema. Este diseño es así debido a que no es necesaria ninguna página de navegación adicional como podría ser una página de registro, de configuración o de error, ya que en un principio la herramienta puede estar incrustada en una página de una comunidad científica ya creada que podría o no tener esas páginas adicionales de navegación personalizadas.

El usuario introducirá los valores que él precise de los parámetros mostrados en la pantalla y podrá decidir qué acción ejecutar por los diferentes botones que se muestran operativos. Los campos de los parámetros que se deben rellenar contienen indicaciones de las unidades que maneja el sistema sobre cada parámetro o un nombre identificativo en caso contrario. Además se ofrece ayuda adicional al usuario si no sabe exactamente en qué puede afectar el valor del parámetro, ya que pasando sobre el nombre del parámetro con el ratón se mostrará un mensaje con información explicativa de dicho parámetro.

Los parámetros se encuentran inicialmente separados en función del campo al que pertenecen como se indica a continuación:

- Geometría de la punta: El voltaje aplicado, el radio de la punta, la longitud de la punta y el semiángulo de la punta.
- Propiedades de la lámina: Constante dieléctrica de la muestra y de la lámina, grosor de la lámina, grosor del sustrato, distancias punta-muestra.
- Fuerza: número de cargas en la punta, segmentos en la punta, número de puntos de la superficie de la punta, número de cargas en la lámina.

- Potencial electrostático: coordenadas eje X para el potencial, coordenadas eje Z para el potencial.

Cada uno de los grupos de parámetros se encuentran separados y se hace notar esta separación también visualmente con diferentes colores en cada campo.

Los parámetros del potencial electrostáticos están ocultos si el usuario selecciona la opción de “fuerza” en la aplicación, si el usuario selecciona “potencial electrostático” estos parámetros se harán visibles al final del formulario.

Además hay un parámetro con una opción que oculta la introducción de un valor numérico, el grosor del sustrato, en el que se puede marcar si se desea como infinito.

La aplicación está diseñada para ser multidispositivo, es decir, la pantalla y las cajas del formulario se adaptarán a cualquier tipo de pantalla, ofreciendo siempre una forma visual agradable gracias a la herramienta Bootstrap.

La comprobación de parámetros se realiza en el lado del cliente con el uso de la biblioteca JQuery, lo que permite una respuesta rápida ante datos incorrectamente introducidos de cara al usuario. También será intuitiva la respuesta del error ya que se marcarán los parámetros incorrectos con un color llamativo.

Estos errores se mostrarán si:

- El usuario introduce un valor no numérico en cualquier parámetros.
- El usuario no completa el número de parámetros mínimo de cada acción:
 - Los tres indicados anteriormente para el sistema de predicción.
 - Si está marcado el check de fuerza, todos los parámetros que se muestran en pantalla deben estar completados.
 - Si está marcado el check de potencial electrostático, todos los parámetros.

Tras cada una de las acciones la pantalla de la aplicación cambiará algunas de las propiedades de su visualización dependiendo del resultado de cada acción. Los posibles cambios son:

- Error de parámetros: cambio de color de los parámetros para señalar cada uno de ellos.
- Botón Calcular: autoescritura del valor del parámetro “número de cargas”.
- Botón Resultado: ningún cambio visual, se abrirá una ventana de diálogo con el archivo que se puede descargar de los resultados.

Para diseñar esta aplicación se ha optado por realizar un prototipo previamente para visualizar cómo puede ser la aplicación final en sus diferentes estados y las características visuales del formulario.

GICM Online

Applied Voltage (v)

Tip radius (nm)

Tip lenght (nm)

Tip half-angle (dg)

Dielectric cte of thin film (2 values)

Thin film thickness (nm)

Substrate thickness (check if infinity) (nm)

Tip sample distances (3 values)

Punctual charges at the tip

Segments at the tip

#points at the tip suface (3 values)

#charges for the thin film and max L

Force

Electrostatic potential

Resultado

Figura 11. Maqueta 1 de la aplicación web

GICM Online

Applied Voltage (v)

Tip radius (nm)

Tip lenght (nm)

Tip half-angle (dg)

Dielectric cte of thin film (2 values)

Thin film thickness (nm)

Substrate thickness (check if infinity) (nm)

Tip sample distances (3 values)

Punctual charges at the tip

Segments at the tip

#points at the tip suface (3 values)

#charges for the thin film and max L

Force

Electrostatic potential

X-coordinate for the potential

Z-coordinate for the potential

Resultado

Figura 12. Maqueta 2 de aplicación web

Predicción de parámetros

Para poder crear un sistema de predicción fiable es necesario tener una gran cantidad de muestras del comportamiento del sistema. Por ello hemos diseñado unas pruebas para ejecutar la herramienta GICM modificando una serie de valores y estudiar a posteriori los resultados obtenidos. El resto de parámetros de configuración de entrada del GICM no se van a modificar durante las pruebas, cumpliendo esta configuración con las siguientes características: la geometría de la punta es redondeada, se marcará para el cálculo de potencial electrostático y el fichero de salida VOutGIC.txt va a devolver el potencial en un solo punto.

Estas pruebas han sido diseñadas para obtener los valores más conflictivos de la herramienta tomando diferentes valores de los siguientes parámetros: constante dieléctrica de la lámina, constante dieléctrica de la muestra y grosor de la lámina.

Para empezar se deberá identificar un valor muy alto en el que el parámetro que queremos predecir posteriormente, el número de cargas, obtiene resultados correctos. Decimos resultados correctos a los obtenidos a partir de un valor del número de cargas y que se mantienen constantes si aumentamos el valor de dicho parámetro hasta infinito, es decir, el resultado es el mismo a partir de cierto valor de número de cargas. Para obtener este valor se deberá ejecutar manualmente la herramienta, comprobando la salida, hasta dar con una estimación que no ralentice la ejecución del software GICM y asegurándonos que sea lo suficientemente alta para evitar comportamientos no deseados.

Una vez identificado el valor de número de cargas descrito en el párrafo anterior, se diseña un algoritmo para ejecutar la herramienta GICM con varios bucles en los que se modifica el valor de los otros tres parámetros que estamos estudiando (constante dieléctrica de la lámina, constante dieléctrica de la muestra y grosor de la lámina) de tal forma que obtengamos resultados *correctos* para cada una de las variaciones. Entre estos resultados obtenidos se encuentra el voltaje de salida que es el que nos interesa guardar. El fichero con los resultados del script que ejecute este algoritmo deberá

contener el valor de cada uno de los parámetros variantes en cada ejecución del bucle acompañados del voltaje resultante.

Se diseña otro script que repita la operación anterior pero modificando en última instancia también el parámetro de número de cargas. El fichero de resultados deberá ser igualmente similar al mencionado anteriormente pero con el valor del parámetro de número de cargas que también cambia en cada ejecución.

Una vez obtenidos ambos ficheros, consideramos los voltajes resultantes del primero, en el que el número de cargas es constante, como voltajes *buenos*, y comparamos los voltajes obtenidos en el segundo fichero para hallar el valor mínimo del número de cargas para cada variante de los otros tres parámetros en el que el voltaje cumpla con un error cuadrático de como máximo un 1% respecto al voltaje *bueno*.

Cuando se haya calculado esta serie de valores mínimos de número de cargas se estudiará la relación que tiene dicho parámetro con el resto (constante dieléctrica de la lámina, constante dieléctrica de la muestra, grosor de la lámina) que hemos variado para obtener las muestras. Si los parámetros tienen relación directa en el comportamiento del número de cargas tendremos que identificar de forma analítica la ecuación que nos de un valor próximo al correcto hasta simplificar la forma de obtener el número de cargas mínimo lo máximo posible.

3.3 Desarrollo

Como en el apartado anterior, es necesario diferenciar el desarrollo de los objetivos parciales independientemente:

Aplicación web

La aplicación web se ha desarrollado en PHP con la utilización de bibliotecas javascript como JQuery para el control de errores de los parámetros y AJAX para las llamadas al servidor con los parámetros introducidos.

El estilo de la página se ha formateado en una hoja de estilos propia CSS que junto con la herramienta Bootstrap hace que la aplicación sea *responsive* en función del tamaño del dispositivo donde se visualiza.

Además se han creado scripts en PHP para ejecutar la aplicación GICM desde el lado del servidor y generar los resultados para luego mandarlos al cliente o navegador web.

Los ficheros de código generados para el servidor han sido los siguientes:

- index.php: archivo principal que contiene el formulario web en HTML y el código javascript, además de las relaciones con las bibliotecas JQuery, Bootstrap y hojas de estilos propias.
- calculateGeninp.php: script llamado por AJAX desde index.php que recibe la lista de parámetros ya validada, crea el fichero geninp.gic que usa de entrada el sistema y ejecuta la herramienta GICM alojada en el servidor.
- downloadOutput.php: script llamado al finalizar la ejecución de GICM, en él se comprime la carpeta con los ficheros creados con la ejecución de la herramienta y se manda el fichero comprimido al lado del cliente para su descarga.
- predictNCharges.php: script llamado por AJAX desde index.php que recibe los parámetros necesarios para la predicción y calculará el valor de número de cargas en función de los parámetros recibidos y devolviendo

el resultado que será escrito en el campo correspondiente de la aplicación.

Además se han incluido en el mismo servidor en la carpeta de acceso público los recursos necesarios para el correcto funcionamiento de la aplicación. La estructura final del proyecto ha sido la siguiente:

- public/
 - css/
 - ✓ style.css : fichero de estilos de la aplicación web
 - js/
 - ✓ scriptErrors.js : fichero con las funciones javascript propias
 - img/ : Directorio donde se encuentran las imágenes de la web
 - ✓ img1.png
 - ✓ img2.png
 - ✓ img3.png
 - ✓ img4.png
 - vendor/ : Directorio donde están los recursos de terceros
 - bootstrap/
 - css/
 - ✓ bootstrap.min.css
 - js/
 - ✓ bootstrap.min.js
 - jquery/
 - js/
 - ✓ jquery.min.js
 - application/
 - ✓ index.php
 - ✓ calculateGeninp.php
 - ✓ downloadOutput.php

Predicción de parámetros

Siguiendo los pasos indicados en el diseño, la predicción de parámetros se ha desarrollado de la siguiente manera:

- ❖ Desarrollo script para obtención de voltajes *buenos*: utilizando la herramienta más rápida para la manipulación de documentos, se ha implementado un script en AWK que modifica los valores de los parámetros en el fichero de entrada de GICM (geninp.gic): constante dieléctrica de la lámina, constante dieléctrica de la muestra y grosor de la lámina, con unos valores comprendidos entre 1 y 1000 para el primer parámetro, 1 y 100 para el segundo y 1 y 20 para el tercero con incrementos variables. El parámetro de número de cargas debe tener un valor calculado previamente de forma manual suficientemente alto para justificar que los resultados obtenidos de la ejecución fuesen *buenos*. El resto de parámetros se han configurado para una geometría de punta redondeada. Tras esta serie de ejecuciones realizadas sobre el intérprete BASH y gracias a la herramienta Cygwin (debido a que GICM no se puede ejecutar en un sistema Linux) se obtiene una serie de valores que llamamos voltajes *buenos* para cada combinación de los tres parámetros variantes.

El pseudocódigo de este script se describe a continuación:

```
*****

finput = fopen("geninp.gic")

foutput = fopen(output_file)

(for i=0; i<1000;i+=var)

    (for j=0; j<100; j+=var)

        (for k=0; k<20; k+=var)

            finput.overwrite(dielectriccte_film, i)

            finput.overwrite(dielectriccte_sample, j)
```

```

        finput.overwrite(film_thickness, k)

        execute (GICM)

        foutGICM = open("VOutGICM.txt")

        v = foutGICM.read(V)

        foutput.write(i j k v)

```

- ❖ Desarrollo script obtención de voltajes con número de cargas variable: se repite el proceso anterior pero esta vez añadiendo un bucle más, por cada valor que toman los parámetros anteriores, el número de cargas toma valores desde el máximo identificado anteriormente hasta 1.

Pseudocódigo de script 2:

```

finput = fopen("geninp.gic")

foutput = fopen(output_file)

(for i=0; i<1000;i+=var)

    (for j=0; j<100; j+=var)

        (for k=0; k<20; k+=var)

            (for l=max; l>=1; l--)

                finput.overwrite(dielectriccte_film, i)

                finput.overwrite(dielectriccte_sample, j)

                finput.overwrite(film_thickness, k)

                finput.overwrite(#charges, l)

                execute (GICM)

                foutGICM = open("VOutGICM.txt")

                v = foutGICM.read(V)

                foutput.write(i j k v l)

```

- ❖ Clasificación valores *buenos*: una vez obtenidos los voltajes de todas las combinaciones de valores del script anterior, se realiza una comparación con los voltajes buenos obtenidos en el primer desarrollo. El objetivo de esta clasificación es descartar aquellos valores del parámetro de número de cargas que tienen un error de más del 1% con respecto al voltaje bueno, y de ellos seleccionar el menor número de cargas posibles.

A continuación se muestra un fragmento de una tabla donde se compara visualmente lo que se ha descrito en el punto anterior. A la izquierda se pueden ver los valores que toman cada uno de los tres parámetros modificados y el considerado voltaje *bueno*, la primera fila indica por pares de columnas el valor del parámetro de número de cargas y las columnas (exceptuando las cuatro primeras) indican el porcentaje de error y el voltaje obtenido para ese número de cargas. En rojo se marcan los casos en los que el porcentaje de error supera el 1%.

#Cargos 800			#Cargos 600	#Cargos 400	#Cargos 300	#Cargos 200	#Cargos 100	#Cargos 50	#Cargos 25	#Cargos 10	#Cargos 5									
e1	e2	h v	ERROR v	ERROR v	ERROR v	ERROR v	ERROR v	ERROR v	ERROR v	ERROR v	ERROR v									
571	96	1 0,0163	0,0000	0,0163	0,0000	0,01627	0,0000	0,01627	0,0000	0,01627	0,0000	0,01627	0,0018	0,0163	0,5556	0,02531	4,1131	0,08319		
571	96	4 0,0116	0,0000	0,0116	0,0000	0,01162	0,0000	0,01162	0,0000	0,01162	0,0000	0,01162	0,0000	0,01162	0,0000	0,01162	2,4501	0,04007		
571	96	7 0,0096	0,0000	0,0096	0,0000	0,00959	0,0000	0,00959	0,0000	0,00959	0,0010	0,0096	0,01971	0,01148	0,8749	0,02750	1,8749	0,02750		
571	96	10 0,0084	0,0000	0,0084	0,0000	0,00844	0,0000	0,00844	0,0000	0,00844	0,0000	0,00844	0,0000	0,00844	0,0000	0,00844	1,5569	0,02158		
571	96	13 0,0077	0,0000	0,0077	0,0000	0,00769	0,0000	0,00769	0,0000	0,00769	0,0000	0,00769	0,0000	0,00769	0,0000	0,00769	1,3459	0,01804		
571	96	16 0,0072	0,0000	0,0072	0,0000	0,00717	0,0000	0,00717	0,0000	0,00717	0,0000	0,00717	0,0000	0,00717	0,0000	0,00717	1,1911	0,01571		
571	96	19 0,0068	0,0000	0,0068	0,0000	0,00678	0,0000	0,00678	0,0000	0,00678	0,0000	0,00678	0,0000	0,00678	0,0000	0,00678	1,0723	0,01405		
761	1	1 0,0102	0,0002	0,0102	0,0008	0,0102	0,0046	0,01063	0,0124	0,10241	0,0381	0,10501	0,1178	0,4822	0,14994	1,0783	2,21024	2,6688	0,41555	
761	1	4 0,0391	0,0003	0,0391	0,0008	0,0391	0,0033	0,03918	0,0092	0,03941	0,0284	0,04016	0,1262	0,04398	0,3931	0,5544	0,9729	0,7704	2,4899	0,13628
761	1	7 0,0259	0,0000	0,0259	0,0004	0,0259	0,0027	0,02599	0,0077	0,02612	0,0251	0,02657	0,1123	0,02883	0,3530	0,03507	0,8908	0,04901	2,3866	0,08778
761	1	10 0,0200	0,0000	0,0200	0,0005	0,0200	0,0025	0,02001	0,0070	0,0201	0,0230	0,02042	0,1032	0,02202	0,3267	0,02648	0,8117	0,03656	2,2751	0,06537
761	1	13 0,0165	0,0000	0,0165	0,0000	0,0165	0,0024	0,01656	0,0067	0,01663	0,0212	0,01687	0,0969	0,01812	0,3069	0,02519	0,7845	0,02948	2,1719	0,0524
761	1	16 0,0143	0,0000	0,0143	0,0000	0,0143	0,0021	0,0143	0,0063	0,01436	0,0203	0,01456	0,0918	0,01558	0,2908	0,01842	0,7444	0,0249	2,0792	0,04394
761	1	19 0,0127	0,0000	0,0127	0,0008	0,0127	0,0024	0,01271	0,0063	0,01276	0,0197	0,01293	0,0875	0,01379	0,2968	0,01619	0,7119	0,0217	1,9945	0,03797
761	20	1 0,0403	0,0000	0,0403	0,0000	0,0403	0,0032	0,04032	0,0036	0,04032	0,0055	0,04054	0,1595	0,04675	0,1066	0,08494	0,4354	0,21552	7,2523	0,34084
761	20	4 0,0202	0,0000	0,0202	0,0000	0,0202	0,0000	0,0202	0,0000	0,0202	0,0030	0,02026	0,0891	0,022	0,6772	0,03388	3,3158	0,08718	6,2940	0,16048
761	20	7 0,0146	0,0000	0,0146	0,0000	0,0146	0,0000	0,01464	0,0000	0,01464	0,0000	0,01464	0,0030	0,01467	0,0717	0,01569	0,5533	0,02724	2,8354	0,05615
761	20	10 0,0119	0,0000	0,0119	0,0000	0,0119	0,0000	0,01189	0,0000	0,01189	0,0025	0,01192	0,0622	0,01263	0,4844	0,1765	2,5234	0,042	5,7315	0,08021
761	20	13 0,0102	0,0000	0,0102	0,0000	0,01024	0,0000	0,01024	0,0000	0,01024	0,0010	0,01025	0,0557	0,01081	0,4365	0,01471	2,3066	0,03386	5,3093	0,06466
761	20	16 0,0091	0,0000	0,0091	0,0000	0,00912	0,0000	0,00912	0,0000	0,00912	0,0022	0,00914	0,0515	0,00959	0,4013	0,01278	2,1327	0,02857	4,9508	0,05437
761	20	19 0,0083	0,0000	0,0083	0,0000	0,00832	0,0000	0,00832	0,0000	0,00832	0,0024	0,00834	0,0481	0,00872	0,3714	0,01141	1,9668	0,02485	6,4627	0,04704
761	39	1 0,0279	0,0000	0,0279	0,0000	0,02791	0,0000	0,02791	0,0000	0,02791	0,0000	0,02791	0,0190	0,02844	0,4683	0,04098	3,9688	0,13668	8,5002	0,26515
761	39	4 0,0157	0,0000	0,0157	0,0000	0,0157	0,0000	0,0157	0,0000	0,0157	0,0000	0,0157	0,0008	0,01584	0,2471	0,01958	2,5834	0,05626	6,9427	0,12747
761	39	7 0,0118	0,0000	0,0118	0,0000	0,01184	0,0000	0,01184	0,0000	0,01184	0,0008	0,01184	0,0068	0,01192	0,2934	0,01413	2,0997	0,0367	9,5961	0,08263

Figura 13. Fragmento de tabla comparativa de voltajes por número de cargas

La tabla comparativa es un instrumento para cerciorarnos de que los resultados son coherentes de forma visual. La operación de selección del valor mínimo de número de cargas se ha realizado computacionalmente a través de un script por la gran cantidad de datos que maneja.

Con la ayuda de un Excel, se comprueba si existe relación alguna entre los valores obtenidos del número de cargas y los valores de los parámetros.

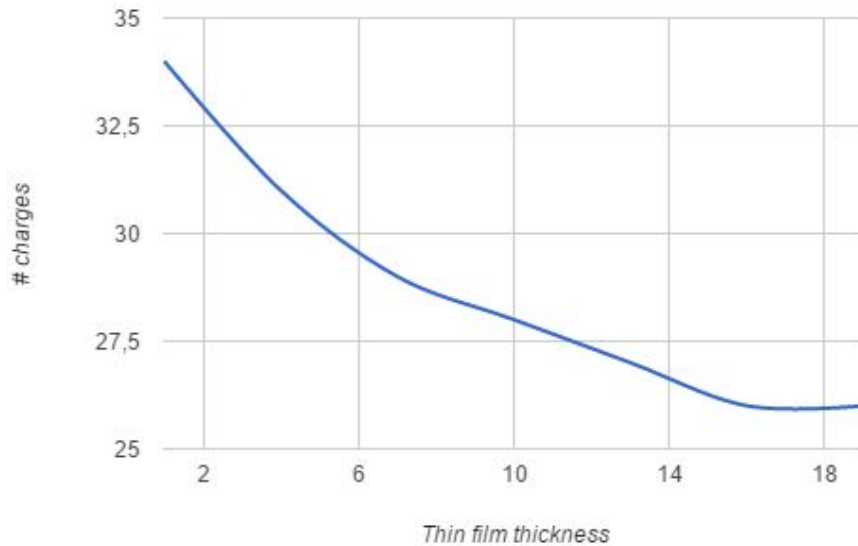


Figura 14. Gráfico de Grosor VS #cargas con constantes dieléctricas 100 y 4

Como se puede observar parece haber una relación parabólica, por lo que se opta por la técnica de mínimos cuadrados para encontrar la relación entre ambos parámetros.

- ❖ Cálculo de ecuaciones parabólicas: para resolver el sistema de ecuaciones por mínimos cuadrados se implementa en Java una herramienta con la que transformamos los valores obtenidos a matrices y una vez transformados se resuelven. Para ello se ha utilizado la biblioteca JAMA que resuelve las operaciones con matrices de una forma rápida y eficaz.

Tras reducir el primer parámetro (grosor de la lámina) con el número de cargas podemos escribir el número de cargas como una función parabólica:

$$\#cargas = Ah^2 + Bh + C$$

donde h representa el grosor de la lámina.

A continuación, intentamos seguir reduciendo la tabla de datos y observamos que hay una relación entre el término independiente de estas ecuaciones (C) con otro parámetro variable (constante dieléctrica de la muestra), y esta relación vuelve a ser parabólica.



Figura 15. Gráfico C-Cte dieléctrica muestra con constante dieléctrica 130

- ❖ En esta ocasión no podemos reducir el tamaño de la tabla de datos con mínimos cuadrados ya que se observa que además de la relación parabólica existente entre C y la constante dieléctrica de la muestra, los otros términos, A y B también dependen de la constante dieléctrica de la lámina.

Al no poder reducirse más la tabla de datos de forma analítica se concluye el desarrollo de la predicción con la única expresión que relaciona parámetro del grosor de la lámina con el número de cargas sin poder reducir los otros dos parámetros.

4. Evaluación de los resultados

Tras los desarrollos pasamos a la fase de probar la herramienta y comprobar los resultados obtenidos con lo esperado.

La parte web ha sido probada en local pero los métodos utilizados funcionan de forma similar que en red, por lo que el funcionamiento va a ser el mismo en un servidor con acceso público desde varios ordenadores simultáneamente aunque pueden variar los tiempos de obtención de resultados debido al peso de la simulación.

Las pruebas se han realizado con la aplicación *Wamp*, que configura un equipo Windows con un servidor local para que el navegador pueda interpretar correctamente los ficheros *.php* dentro del sistema en una carpeta seleccionada.

Durante estas pruebas se ha podido observar que la aplicación web responde correctamente, la funcionalidad descrita de manejo de errores y el diseño responsive realizan la función que tienen que hacer cuando el usuario modifica la pantalla o cuando introduce los parámetros incorrectamente.

Además, se ha probado a ejecutar la herramienta GICM completando todos los parámetros para obtener los resultados, y la descarga de datos comprimidos se ha realizado correctamente. Si se observan los ficheros generados tras la ejecución dentro del servidor montado en nuestro equipo se puede ver que la ejecución se realiza correctamente y los ficheros generados tienen los mismos resultados que si ejecutamos la herramienta GICM offline con los mismos parámetros.

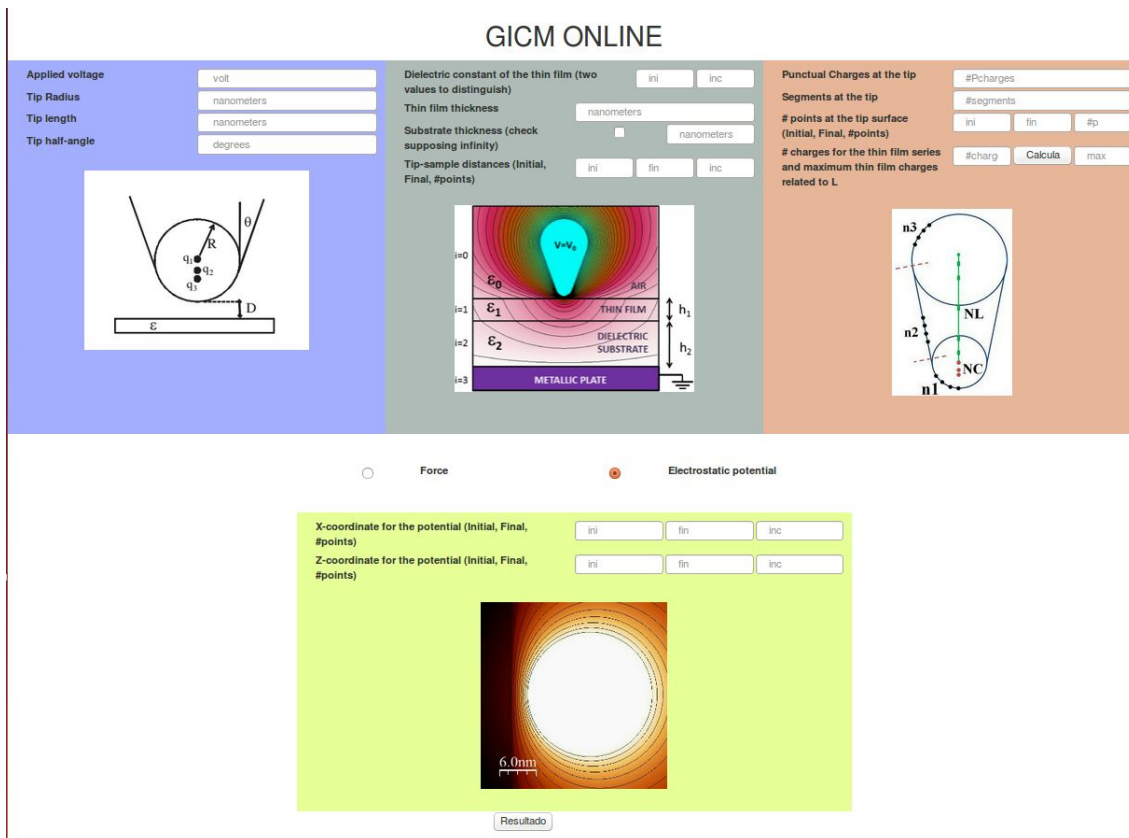


Figura 16. Captura de pantalla de aplicación web

En cuanto a la funcionalidad de la Predicción de parámetros, internamente los resultados obtenidos durante las pruebas a través de la ecuación calculada de forma analítica por mínimos cuadrados que relaciona el parámetro de número de cargas con el grosor de la lámina han sido coherentes, demostrando su validez al introducir los valores obtenidos del número de cargas en la aplicación y comprobando su resultado visualmente en la herramienta WSxM para cada valor de los dos parámetros de constantes dieléctricas, pero no se ha conseguido el desarrollo deseado debido a la imposibilidad de reducir el cálculo de número de cargas en base a todos los parámetros estudiados a través del análisis de regresión.

5. Conclusiones y trabajo futuro

El objetivo de adaptación de la herramienta GICM a una aplicación web se ha cumplido y funciona correctamente, las ayudas visuales y la información que muestra por pantalla es clara por lo que la herramienta GICM Online ha mejorado la facilidad de su uso como se pretendía.

Por otro lado el sistema de predicción no se ha podido obtener analíticamente como estaba previsto debido a la dependencia de varios parámetros a partir de la primera reducción, por lo que para calcularlo en el futuro se deberán emplear modelos de **redes neuronales artificiales**.

La aplicación web se ha conseguido probar en local, por lo que si se quiere subir a la red pública no deberá dar más problemas que el paso de una aplicación a producción: los enlaces a recursos online se deberán cambiar por enlaces locales habiendo descargado previamente esos recursos, cambios en los ficheros de configuración, etc.

Otra función importante a tener en cuenta es que la herramienta tendrá que ser capaz de trabajar con múltiples usuarios simultáneamente, por lo que se deberá cambiar el modo de ejecución de GICM para que acepte los parámetros introducidos como argumento y no a través de la escritura de fichero, que puede ocasionar conflictos entre varios usuarios escribiendo a la vez.

La salida de resultados con múltiples usuarios trabajando sobre la herramienta puede ocasionar conflictos en el fichero devuelto, por lo que se podrían tomar medidas para evitar estos posibles conflictos de escritura de dos formas: creando ficheros con diferentes nombres por usuario o bien creando directorios donde se guardarán los ficheros específicos para cada usuario. Ambas soluciones incluyen la necesidad de una sesión u otra forma similar de controlar el usuario que ejecuta la herramienta..

Una forma de mejorar la salida de resultados podría ser dejar al usuario seleccionar cómo quiere recibirlos, si es en fichero con el tipo de fichero (txt, csv), por pantalla, enviarlos por correo o a través de alguna aplicación, etc.

Otra mejora de la aplicación web consistiría en el desarrollo de una herramienta similar a WSxM o enlazar el término de la ejecución con una herramienta ya creada que sea capaz de interpretar los datos de salida y crear una imagen a partir de ellos de forma que el usuario vea el resultado obtenido directamente de manera gráfica.

Referencias

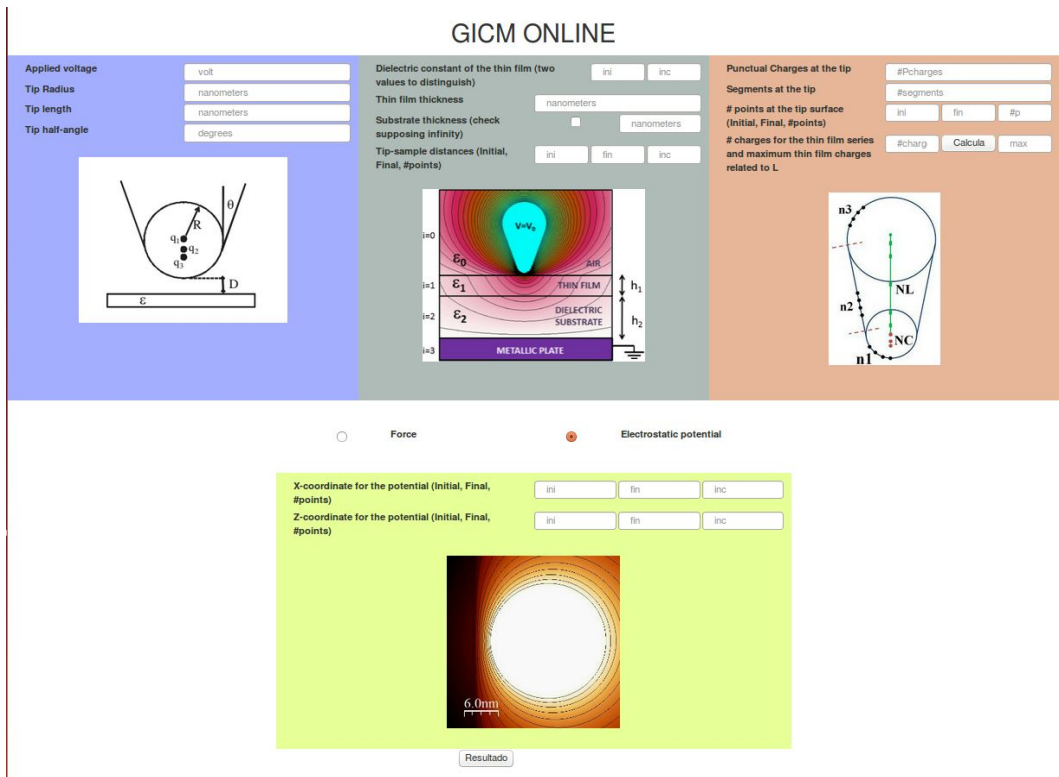
1. <http://arantxa.ii.uam.es/~sacha/GICM/GICM.htm>
2. <http://www.nanotecnologia.cl/que-es-nanotecnologia/>
3. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1965/feynman-bio.html
4. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1986/speedread.html
5. <http://mathworld.wolfram.com/GreensFunction.html>
6. G. M. Sacha, E. Sahagún and J. J. Sáenz. Journal of Applied Physics 101, 024310 (2007)
7. G. M. Sacha, F. B. Rodríguez, E. Serrano and P. Varona. Journal of Electromagnetic Waves and Applications 24, 1145 (2010)

Anexos

Anexo A. Capturas de pantalla de la aplicación web



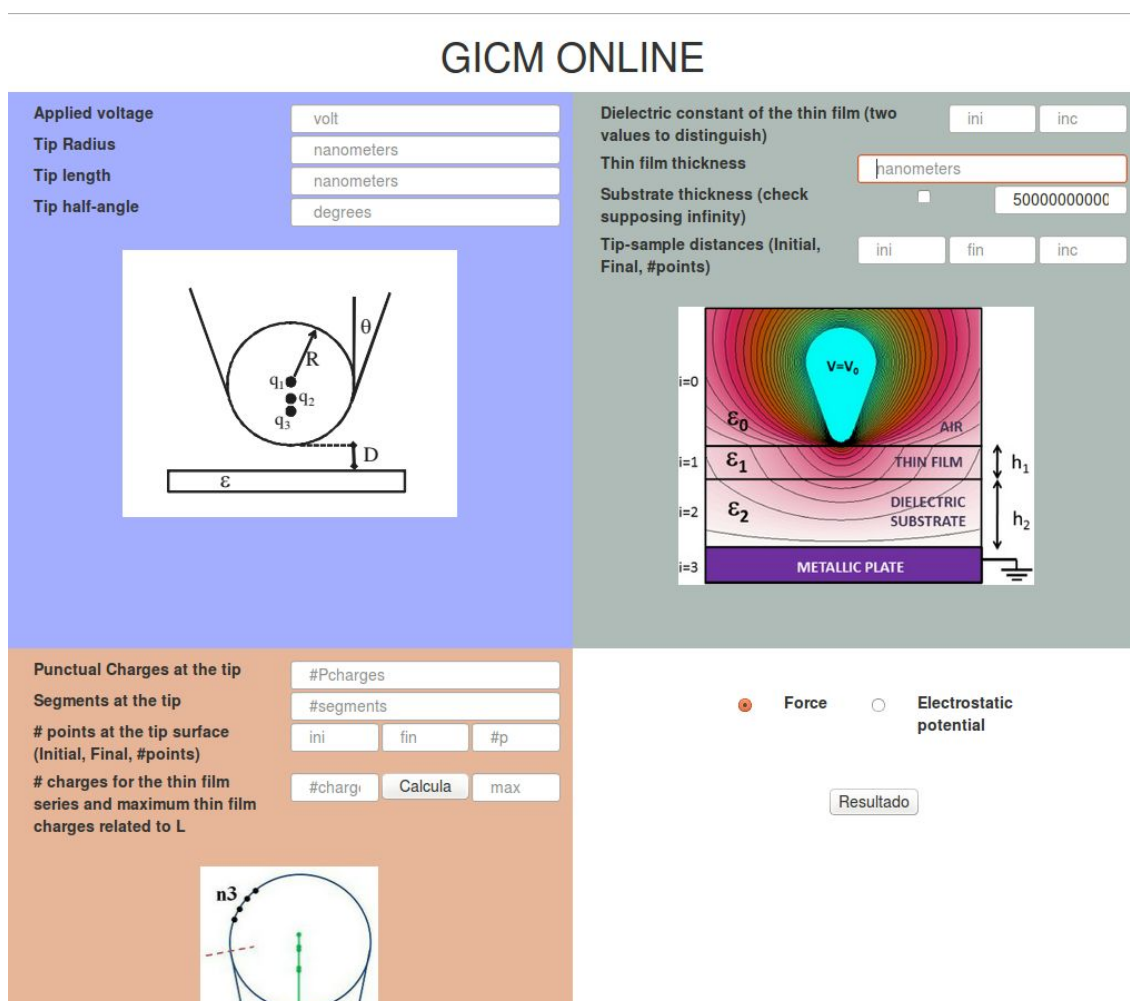
Visualización de la aplicación web con el parámetro de cálculo de fuerzas seleccionado



Visualización de la aplicación web con el parámetro de cálculo de potencial electrostático seleccionado



Visualización de la aplicación web con parámetro de grosor del sustrato con valor infinito.



Visualización de aplicación web con pantalla en formato tablet.

GICM ONLINE

Applied voltage

Tip Radius

Tip length

Tip half-angle



Dielectric constant of the thin film (two values to distinguish)

Thin film thickness

Substrate thickness (check supposing infinity)
☐

Tip-sample distances (Initial, Final, #points)



Visualización de la aplicación web con pantalla formato móvil.

Anexo B. Tablas de datos

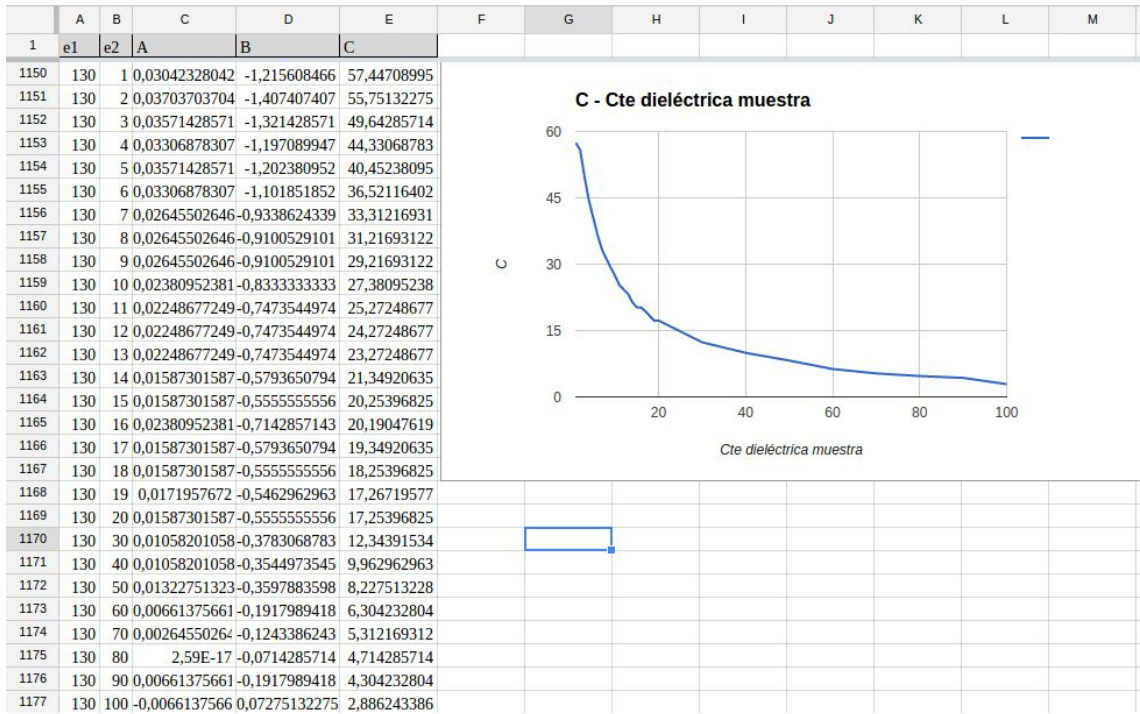


Tabla de datos correspondiente a la figura 14, relacionando con una parábola los valores de e2 (constante dieléctrica de la muestra) y el término independiente de la ecuación C.

	A	B	C	D	E
1	e1	e2	h	v	#cargasMin
6883	100	4	1	0.26682	34
6884	100	4	4	0.15102	31
6885	100	4	7	0.11545	29
6886	100	4	10	0.09728	28
6887	100	4	13	0.08612	27
6888	100	4	16	0.07853	26
6889	100	4	19	0.07301	26

Tabla de datos de la figura 13, relacionando el parámetro h (grosor de la lámina) y el número de cargas.